

## МОДЕЛЬ АГРЕГАЦИИ В ЛИОТРОПНЫХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СРЕДАХ

Данная работа является продолжением работы [1] с целью создания комплекса моделей роста пространственных структур ЛЖК, объединенных методом моделирования, физическими приближениями и предметом исследования. Модель обратимого процесса агрегации является более общим случаем модели, рассмотренной в работе [1].

Имитация процесса агрегации происходит в среде клеточных автоматов [2]: пространство представлено равномерной решеткой, единицей времени является итерационный цикл, в котором рассчитывается новое состояние ячеек решетки. Решетка заполнена частицами, находящимися в трех различных состояниях: «агрегированном», «подвижном» и «свободном» (частицы среды). Движение подвижных частиц – броуновская диффузия. Агрегированные частицы неподвижны. Правила агрегации (движения границы раздела фаз) реализуются в окрестности Мура.

Граничные условия - периодические.

Начальные условия: на решетке равномерно размещено заданное количество подвижных частиц (L), которые испытывают броуновское движение; соседние частицы слипаются друг с другом с вероятностью  $P_k$  (где  $k$  – координационное число частицы в агрегате), переходя в агрегированное состояние (S) (диффузия в агрегате отсутствует, растущая фаза неподвижна); частица на границе агрегата может перейти в состояние L с вероятностью  $P'_k$ . Таким образом реализуется механизм обратимой агрегации: идет постоянный обмен частицами между средой и агрегатом.

$x_{i,j}(t) \square S \square x_{i,j}(t+1) \square L$  с вероятностью  $P'_k$

$x_{i,j}(t) \square L \square x_{i,j}(t+1) \square S$  с вероятностью  $P_k$ , где  $k$  – координационное число частицы в агрегате ( $S \square M_{i,j}(t)$ ,  $M_{i,j}(t)$  – окрестность Мура,  $k=(1..4)$ ).

Модель позволяет измерить следующие параметры: кинетика роста агрегатов, фрактальная размерность, среднее координационное число частиц в кластере.

- 
1. Беклемишев К.А., Берг Д.Б. Образование доменной структуры фосфолипидного бислоя при двумерном фазовом переходе «ЖК-гель»: компьютерный эксперимент// Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2001. Вып. 1. С. 53-59.
  2. Тоффоли Т., Марголус Н. Машины клеточных автоматов. М.: Мир, 1991. 280 с.